

平成 22 年 3 月 31 日現在

研究種目： 特定領域研究

研究期間： 2006～2009

課題番号： 18079007

研究課題名（和文）代数幾何学的方法による情報物理学理論の確立

研究課題名（英文）Establishment of Information Physics based on algebraic geometry

研究代表者

渡邊 澄夫（WATANABE SUMIO）

東京工業大学・精密工学研究所・教授

研究者番号： 80273118

研究成果の概要（和文）：情報学で用いられる多数の学習システムは縮退したフィッシャー情報行列を持つ特異モデルであるため、正則モデルの統計理論で学習の挙動を解明することはできなかった。本研究では高次元代数幾何学を基礎として特異モデルの挙動解明を行うことができる情報物理学理論を確立した。この結果、学習誤差と汎化誤差の漸近挙動が二つの双有理不変量により定まることが明らかになり、真の分布が不明なとき特異でも正則でも学習誤差から汎化誤差を推測することができる新しい情報量規準の導出に成功した。

研究成果の概要（英文）：Almost all learning machines used in information science are singular because they have degenerate Fisher Information matrices. Regular statistical theory can not be applied to singular learning machines. In this research, we established new information physics theory for singular learning machines based on higher dimensional algebraic geometry, and clarified that the asymptotic behaviors of generalization and training errors are determined by two birational invariants. Based on new theory, we derived a widely applicable information criterion, by which the generalization error can be estimated from training error in both singular and regular learning machines.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	4,600,000	0	4,600,000
2007 年度	14,000,000	0	14,000,000
2008 年度	14,000,000	0	14,000,000
2009 年度	13,200,000	0	13,200,000
年度			
総計	45,800,000	0	45,800,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・感性情報学/ソフトコンピューティング

キーワード：代数幾何，情報物理学，学習理論，特異点論，超関数論，確率過程論

1. 研究開始当初の背景

情報学では多種類の学習システムが利用されている。例えば、人工神経回路網、混合正規分布、隠れマルコフモデル、ベイズネットワーク、確率文脈自由文法などが代表的な学習

モデルである。情報学における学習は統計学における統計的推測と数学的には同じ概念であるが、情報学において現れる学習システムは統計学的な観点からは縮退したフィッシャー情報行列を持つ特異モデルであり、正則モ

デルの論で挙動を調べることはできなかった。具体的には統計学における以下の概念は特異モデルでは用いることができなかった。クラメル・ラオの不等式, 最尤推定量の漸近正規性, ベイズ事後分布の正規分布への収束, 赤池情報量規準(AIC), ベイズ情報量規準(BIC). 尤度関数あるいは事後分布は対数尤度関数をハミルトニアンとする平衡状態に相当するが, 特異モデルの学習理論を作るためには, 縮退した基底状態を持つ平衡状態を解析できる新しい情報物理学の建設が必要であった。

2. 研究の目的

学習理論においては, 与えられたデータから計算できる学習誤差と未知のデータに対して予測したときの汎化誤差について確率変数としての挙動を導出し, 学習誤差と汎化誤差の数学的関係を解明することが望まれる。学習誤差と汎化誤差は, 情報物理学においては平衡状態にある物理量の平均値に相当するから, 特異な平衡状態における平均操作の挙動を数学的に扱う方法を作ることが必要である。また, 平均操作を計算機で実現するためのアルゴリズム, および平衡状態を近似する際の近似精度を解明することが求められる。

3. 研究の方法

学習理論における尤度関数あるいは事後分布は, 物理学において対数尤度関数をランダム・ハミルトニアンとする平衡状態と同じである。数理物理学において平衡状態の挙動を解明するためには観測量の代数的な構造に適合する表現空間を与えればよいという方針は, 荒木・ハーグにより 1960 年代に代数的場の量子論として作られていた。本研究では, 特異モデルの学習理論の建設を目指して, 対数尤度関数の特異点の近傍での代数的な性質を適切に表現する空間を代数幾何学的方法によって与え, 平衡状態の挙動を数学的に明らかにする。また, 平衡状態を計算機で実現する方法の特異点の近傍での挙動を調べ, さらに, 平均場近似の精度を解明する。

4. 研究成果

(1) 学習誤差と汎化誤差の漸近挙動が対数尤度比関数から定義される二つの双有理不変量で定まることを数学的に証明した。そのひとつは対数閾値と呼ばれるものであり, 極小モデル・プログラムに現れ, 高次元代数幾何学で主要な役割を果たす量である。もうひとつは特異ゆらぎと呼ばれるものであり, 本研究において発見された双有理不変量である。以上の結果から学習誤差から汎化誤差を推定できる恒等式を導出できる。この恒等式は真の分布・学習モデル・事前分布が何であっても成立するため応用範囲は極めて広い。正則モデルにおける AIC を特異モデルでも成立する

ように一般化したものに相当する。

(2) 学習システムを構築するとき, 与えられた対数尤度関数をハミルトニアンとする平衡状態を実現する必要がある。特異モデルで現れる縮退した平衡状態を実現するためには多数の異なる温度間の相互作用を取り入れたモンテカルロ法が有効であることが知られている。本研究では異なる温度間の入れ替えの確率が対数閾値で定まる値になることを証明した。これより, モンテカルロ法の代数幾何学的な性質が解明され, 温度の交換確率を一定にするための温度列の最適な設計法を導出することが可能になった。

(3) 特異モデルにおいて平衡状態の実現が演算量的に困難である場合には平均場を用いて近似する方法があり, 変分ベイズ法と呼ばれている。本研究では特異モデルの変分ベイズ法における自由エネルギーの挙動を解明し, 真の平衡状態の自由エネルギーと比較することで, 平均場近似の精度を理論的に解明した。

(4) 上記の理論的な成果を, 人工神経回路網, 混合正規分布, 隠れマルコフモデルなどに応用し, それぞれの学習モデルの挙動を解明した。

これらの研究成果は, 単著の英文書籍や 5 回の招待講演に見られるように国内・海外から高い評価を得ている。特に近年, 急激に発展している代数統計学と呼ばれる分野において外国のまねではない日本発の独創的な研究として知られるようになった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 17 件)

① S. Watanabe, "Equations of states in statistical learning for an unrealizable and regular case," IEICE Transactions, Vol. E93-A, No. 3, pp. 617-626, 2010, March. 査読有。

② S. Watanabe, "Equations of states in singular statistical estimation", Neural Networks, Vol. 23, No. 1, pp. 20-34, 2010, January. 査読有。

③ K. Yamazaki, M. Aoyagi, S. Watanabe, "Asymptotic Analysis of Bayesian Generalization Error with Newton Diagram", Neural Networks, Vol. 23, No. 1, pp. 35-43, 2010, January. 査読有。

- ④ K. Watanabe, M. Shiga, S. Watanabe, "Upper bound for variational free energy of Bayesian networks," *Machine Learning*, vol. 75, no. 2, pp. 199-215, 2009. 査読有.
- ④ Y. Nishiyama, S. Watanabe, "Accuracy of Loopy Belief Propagation in Gaussian Models," *Neural Networks*, Vol. 22, No. 4, pp. 385-394, May 2009. 査読有.
- ⑤ 梶大介, 渡辺澄夫, "形式的情報量規準による決定株を用いた AdaBoost のモデル選択", *電子情報通信学会誌 D*, Vol. J92-D, Vol. J92-D, No. 11, pp. 2051-2058, 2009. 査読有.
- ⑥ K. Nagata, S. Watanabe, "Asymptotic Behavior of Exchange Ratio in Exchange Monte Carlo Method," *Neural Networks*, Vol. 21, No. 7, pp. 980-988, 2008. 査読有.
- ⑦ K. Nagata, S. Watanabe, "Exchange Monte Carlo Sampling From Bayesian Posterior for Singular Learning Machines," *IEEE Transactions on Neural Networks*, Vol. 19, No. 7, pp. 1253-1266, 2008. 査読有.
- ⑧ K. Nagata, S. Watanabe, "Theory and Experiments of Exchange Ratio for Exchange Monte Carlo Method," *Neural Information Processing - Letters and Reviews*, Vol. 12, No. 1-3, pp. 21-30, 2008. 査読有.
- ⑨ 藤原香織, 渡辺澄夫, "特異モデルにおけるベイズ検定と時系列解析への応用," *電子情報通信学会論文誌 D*, Volume J91-D, No. 4, pp. 889-896, 2008. 査読有.
- ⑩ S. Nakajima, S. Watanabe, "Variational Bayes Solution of Linear Neural Networks and its Generalization Performance," *Neural Computation*, vol. 19, no. 4, pp. 1112-1153, 2007. 査読有.
- ⑪ K. Watanabe, S. Watanabe, "Estimating the Data Region Using Minimum and Maximum Values," *Interdisciplinary Information Sciences*, Vol. 13, No. 2, pp. 151-161, 2007. 査読有.
- ⑫ K. Watanabe, S. Watanabe, "Stochastic complexity for mixture of exponential families in generalized variational Bayes," *Theoretical Computer Science*, Vol. 387, pp. 4-17, 2007. 査読有.
- ⑬ K. Watanabe, S. Watanabe, "Stochastic complexities of gaussian mixtures in variational bayesian approximation," *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 7, pp. 625-644, 2006. 査読有.
- ⑭ S. Nakajima, S. Watanabe, "Generalization Performance of Subspace Bayes Approach in Linear Neural Networks," *IEICE Transactions*, Vol. E89-D, no. 3, pp. 1128-1138, 2006. 査読有.
- ⑮ 西山 悠, 渡辺澄夫, "完全 2 部グラフ型ボルトマンマシンの平均場近似による確率的複雑さについて," *電子情報通信学会論文誌*, Vol. J89-A, no. 8, pp. 671-678, 2006. 査読有.
- ⑯ 高松慎吾, 中島伸一, 渡辺澄夫, "局所化ベイズ学習法" *電子情報通信学会論文誌*, Vol. J89-D-II, no. 10, pp. 2260-2268, 2006. 査読有.
- ⑰ 星野力, 渡辺一帆, 渡辺澄夫, "隠れマルコフモデルの変分ベイズ学習における確率的複雑さについて" *電子情報通信学会論文誌*, Vol. J89-D-II, No. 6, pp. 1279-1287, 2006. 査読有.
- [学会発表] (計 37 件)
- ③ D. Kaji, S. Watanabe, "Optimal Hyperparameters for Generalized Learning and Knowledge Discovery in Variational Bayes," *International Conference on Neural*

Information Processing, Dec 1-5, 2009, Bangkok, Thailand.

⑤ S. Watanabe, "A Singular limit theorem in statistical learning theory,"

Mathematical Quantum Field Theory and Renormalization Theory, Nov 26-29, 2009, Kyushu Univ. (Invited).

④ K. Fujiwara, S. Watanabe, "Determining the Number of the Components of Gaussian Mixture Models by Bayesian Hypothesis Testing," The 12th IASTED International Conference on Intelligent systems and control, Nov 2 - 4, 2009, Cambridge, Massachusetts, USA.

① T. Iwagaki, S. Watanabe, "Generalization Error by Langevin Equation in Singular Learning Machines," International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Oct 18-21, 2009, Sapporo, Japan.

② S. Oyama, S. Watanabe, "Phase Transition of Generalization Errors in Variational Bayes Learning," International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Oct 18-21, 2009, Sapporo, Japan.

⑬ S. Watanabe, "Algebraic geometrical method in singular statistical estimation," Algebraic Statistics, Mathematical Sciences Research Institute, University of California, 2008. Dec 15-18, Berkeley, USA. (Invited).

⑥ K. Yamazaki, S. Kaski, "An Analysis of Generalization Error in Relevant Subtask Learning," International Conference on Neural Information Processing of the Asia-Pacific Neural Network Assembly, Nov 25-28, 2008, Auckland, New Zealand.

⑦ K. Nagata, S. Watanabe, "Design of Exchange Monte Carlo Method for Bayesian Learning in Normal Mixture Models" International Conference on Neural Information Processing of the Asia-Pacific Neural Network Assembly, Nov 25-28, 2008, Auckland, New Zealand.

⑧ D. Kaji, S. Watanabe, "Model Selection Method for AdaBoost Using Formal Information Criteria" International Conference on Neural Information Processing of the Asia-Pacific Neural Network Assembly, Nov 25-28, 2008, Auckland, New Zealand.

⑨ M. Matsumoto, S. Watanabe, "Experimental Study of Ergodic Learning Curve in Hidden Markov Models," International Conference on Neural Information Processing of the Asia-Pacific Neural Network Assembly, Nov 25-28, 2008, Auckland, New Zealand.

⑮ S. Watanabe, "Algebraic Geometry, Empirical Process, and Singular Model Evaluation," Algebraic Methods in Systems Biology and Statistics, Sep 14-17, 2008, Research Triangle Park, NC, USA. (Invited).

⑩ T. Matsuda, S. Watanabe, "Weighted Blowups of Kullback Information and Application to Multinomial Distributions," Proceedings of International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications, Sep 7-10, 2008, Budapest, Republic of Hungary.

⑪ Y. Nishiyama, S. Watanabe, "Generalization of Concave and Convex Decomposition in Kikuchi Free Energy," International Conference on Artificial Neural Networks, Sep 3-6, 2008, Prague, Czech Republic.

- ⑬ Y. Nishiyama, S. Watanabe, "On the Minima of Bethe Free Energy in Gaussian Distributions," Proceedings of International Conference on Artificial Intelligence and Softcomputing, pp.1075-1086, Sep 1 - 3, 2008, Palma de Mallorca, Spain.
- ⑭ S. Watanabe, "What we can estimate about singularity from random samples," Seasonal Institute of the mathematical society of Japan, Kyoto, Japan, Jul 28 - Aug 8, 2008, Kyoto, Japan. (Invited).
- ⑫ S. Watanabe, "A formula of equations of states in singular learning machines," IEEE World Congress in Computational Intelligence, June 1-6, 2008, Hong kong, China.
- ⑮ K. Yamazaki, S. Watanabe, "Experimental Bayesian generalization error of nonregular models in covariate shift," Proc. of ICONIP2007, Nov 13-16, 2007, Kitakyushu, Japan.
- ⑯ Kenji Nagata, S. Watanabe, "Experimental Analysis of Exchange Ratio in Exchange Monte Carlo Method," Proc. of ICONIP2007, Nov 13-16, 2007, Kitakyushu, Japan.
- ⑰ S. Nakajima, S. Watanabe, "Generalization Error of Automatic Relevance Determination, Proc. of ICANN, 2007, pp. 1-10. September 9-13, 2007, Porto, Portugal.
- ⑱ T. Matsuda, S. Watanabe, "On a Singular Point to Contribute to a Learning Coefficient and Weighted Resolution of Singularities," Proc. of ICANN, pp.11-18, Sep 9-13, 2007, Porto, Portugal.
- ⑲ Y. Nishiyama, S. Watanabe, "Theoretical Analysis of Accuracy of Gaussian Belief Propagation," Proc. of ICANN, pp.29-38, Sep 9-13, 2007, Porto, Portugal.
- ⑳ K. Nagata, S. Watanabe, "Algebraic Geometric Study of Exchange Monte Carlo Method," Proc. of ICANN, pp. 687-696, Sep 9-13, 2007, Porto, Portugal.
- ㉑ R. Iriguchi, S. Watanabe, "Estimation of Poles of Zeta Function in Learning Theory Using Pade Approximation," Proc. of ICANN, pp. 88-97, Sep 9-13, 2007, Porto, Portugal.
- ㉒ M. Aoyagi, S. Watanabe, "Resolution of Singularities and Stochastic Complexity of Complete Bipartite Graph-Type Spin Model in Bayesian Estimation," Proc. of MDAI, pp. 443-454, Aug 16-18, 2007, Kitakyushu, Japan.
- ㉓ K. Yamazaki, M. Kawanabe, S. Watanabe, M. Sugiyama, K.-R. Muller, "Asymptotic Bayesian Generalization Error When Training and Test Distributions Are Different," Proc. of ICML, June 20-24, 2007, Corvallis, Oregon, USA.
- ㉔ K. Nagata, S. Watanabe, "Analysis of Exchange Ratio for Exchange Monte Carlo Method" Proc. of FOCI2007, April 1-5, 2007, Honolulu, Hawaii.
- ㉕ S. Watanabe, "Almost All Learning Machines are Singular, Proc. of FOCI, pp.383-388, April 1-5, 2007, Honolulu, Hawaii. (Invited).
- ㉖ M. Aoyagi, S. Watanabe, "Generalization Error of Three Layered Learning Model in Bayesian Estimation," Proc. of the 2nd IASTED International Conference on Computational Intelligence,

pp. 405-410, Nov. 20-22, 2006, San Francisco, California, USA.

㉑ T. Hosino, K. Watanabe, S. Watanabe "Free Energy of Stochastic Context Free Grammar on Variational Bayes," Proc. of ICONIP, Vol.1, pp.407-416, Oct 3-6, 2006, Honkong, China.

㉒ S. Takamatsu, S. Nakajima, S. Watanabe, "Localized Bayes Estimation for Non-identifiable Models," Proc. of International Conference on Neural Information Processing, pp.650-659, Oct 3-6, 2006, Honkong, China.

㉓ Yu Nishiyama, S. Watanabe, "Asymptotic Behavior of Stochastic Complexity of Complete Bipartite Graph-Type Boltzmann Machines," Proc. of ICONIP, vol.1, pp.417-426, Oct 3-6, 2006, Honkong, China.

㉔ K. Watanabe, M. Shiga, S. Watanabe, "Upper bounds for variational stochastic complexities of Bayesian networks," Proc. of International Conference on Intelligent Data Engineering and Automated Learning, pp.139-146, Sep 20-23, 2006, Burgos, Spain.

㉕ K. Nagata, S. Watanabe, "Generalization Performance of Exchange Monte Carlo Method for Normal Mixture Models," Proc. of 7th International Conference on Intelligent Data Engineering and Automated Learning, pp.125-132, Sep 20-23, 2006, Burgos, Spain.

㉖ T. Matsuda, S. Watanabe, "Analytic Equivalence of Bayes a Posteriori Distributions," Proc. of ICANN, Vol.1, pp.113-121, Sep 10-14, 2006, Athens, Greece.

㉗ K. Yamazaki, K. Nagata, S. Watanabe, Klaus-Robert Muller, "A Model Selection Method Based on Bound of Learning Coefficient," Proc. of ICANN, Vol.2, pp.371-380, Sep 10-14, 2006, Athens, Greece.

㉘ S. Nakajima, S. Watanabe, "Analytic Solution of Hierarchical Variational Bayes in Linear Inverse Problem," Proc. of International Conference on Artificial Neural Networks, pp.240-249, Sep 10-14, 2006, Athens, Greece.

㉙ K. Nagata, S. Watanabe, "The Exchange Monte Carlo Method for Bayesian Learning in Singular Learning Machines," Proc. of IEEE World Congress on Computational Intelligence, pp.6383-6389, July 16-21, 2006, Vancouver, Canada.

[図書] (計1件)

S. Watanabe, "Algebraic Geometry and Statistical Learning Theory," Cambridge University Press, Cambridge, UK, pp.1-286, 2009, September.

[その他]

<http://watanabe-www.pi.titech.ac.jp/~swatanab/index-j.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者
渡邊 澄夫 (WATANABE SUMIO)
東京工業大学・精密工学研究所・教授
研究者番号: 80273118

(2) 研究分担者
なし

(3) 連携研究者
山崎 啓介 (YAMAZAKI KEISUKE)
東京工業大学・精密工学研究所・助教
研究者番号: 60376936